

「富岳」本格運用時のHPCIおよび次期フラッグシップ計算機の在り方について（案）

HPCIコンソーシアム副理事長

高木亮治

（宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所）

報告書（案）の位置づけ

- 令和3年：「【提言】今後のHPCIシステムの構築とその利用に関する基本的な考え方について」

上記の提言に続き、

- 計算科学・計算機科学コミュニティから寄せられた意見をもとに、
 - 「富岳」成果創出加速プログラム
 - HPCIエコシステム
 - 次期フラッグシップ計算機

に関して調査・検討を行い、その結果をまとめた。

報告書（案）の内容

- はじめに（1章）
- 「富岳」成果創出加速プログラム（2章）
 - 人材育成
 - 課題実施体制
 - 評価および進捗管理
 - 「富岳」運用への要望
- HPCIエコシステムの構築（3章）
- 次期フラッグシップ計算機の開発（4章）
 - 独自技術と汎用性
 - 目指すべき方向性
 - アプリケーション・ソフトウェア
 - フラッグシップ計算機と第2階層計算機
 - 費用配分
 - Feasibility Study（FS）
- あとがき（5章）
- 付録

1.はじめに

- HPCIの説明
- HPCIを取り巻く状況

HPCIを取り巻く我が国の状況としては、第6期科学技術・イノベーション基本計画が策定され、国が推進する長期的な科学技術政策としてSociety5.0の実現、持続可能な社会への変革、研究力強化、教育・人材育成などが謳われており、これらの事業に対して「富岳」を中心としたHPCIを活用した計算科学が非常に重要な役割を担うことが期待されている。

- WGと報告書（案）の位置づけ
- 報告書（案）の構成

2. 「富岳」成果創出加速プログラム

- HPCI戦略プログラム（124.1億円）、ポスト「京」重点課題（109.8億円）からの大幅な予算削減（令和2年度は9.0億円、令和3年度は10.9億円）
- 短期的には「富岳」による成果創出が十分に実施できない可能性
- 長期的には人材育成・教育活動への投資が不十分
- 将来的なアプリケーション・ソフトウェアの研究開発能力の低下、計算科学ひいては基礎科学の衰退、世界に対する研究競争力、産業競争力の低下
- 現状実施している「富岳」成果創出加速プログラムの問題点を指摘し、改善点を提言する。

2.1 人材育成

- 大幅な予算削減により、「富岳」が稼働して研究が本格化した段階で貴重な人材（若手研究者）を失った課題もある。
- 「富岳」の成果を創出する多様な人材（大学、研究機関における研究人材、ソフトウェアベンダーにおける開発人材、産業界における活用人材）が必要である。
- アプリケーション・ソフトウェアの開発やチューニングを行える人材の育成は、これまでもフラッグシップ計算機開発プロジェクトで行われて来たが、現在のようにフラッグシップ計算機開発の端境期（運用期）において、人材育成を主眼としない成果創出加速プログラムだけが実施されている状況では、人材育成のための予算が非常に少なく継続的な人材育成が困難な状況である。
- 科学技術関連の競争的資金では成果創出に重きが置かれ、このような人材育成は非序に困難である。
- 計算科学・計算機科学における人材育成に対して継続的かつ計画的に投資すべきである。

2.2 課題実施体制（1/3）

- 全体的に課題の規模が小さくなったことによるメリットもあったが、はるかに大きなデメリット、弊害があると指摘されている。
- 予算削減によって成果の普及や人材育成などの計算科学技術振興に関する活動が実施できなくなった。
- 課題が細切れで、ばらばらに研究を進めることになり、課題間での情報交換や連携が困難になったとの指摘もある。それぞれの立場で努力はされているが非常に困難な状況である。
- 分野間の情報交換や分野間連携は長期的な視点で継続して実施することが重要であり、そのための予算的な支援が必要である。

2.2 課題実施体制 (2/3)

- 分野内においても、いくつかの小規模な課題に分割された結果、分野全体として戦略的に研究を進めることができず研究の効率が悪くなっている。
- 課題および分野間の交流・連携を進める施策を積極的に実施すべきである。
- 研究開発や人材育成などの計算科学技術振興などの進め方はそれぞれの分野で違いがあり、比較的まとまったグループで研究開発を実施する場合は望ましい場合もある。
- 参加者の固定化は避けるべきであり、少人数による挑戦的な課題が容易に参入できるなど、課題もしくは分野の状況に応じたより柔軟な制度が望ましい。

2.2 課題実施体制（3/3）

- 現状で、短期的な成果が求められる「富岳」成果創出加速プログラムしかない状態では、最重要な科学的・社会的成果を継続して創出することは困難である。
- 「富岳」の成果最大化のためには、今後数年間に渡って「富岳」をフルに活用できる安定的な体制（プロジェクト）を継続することが必要である。
- 特に、将来を考えたときに継続的かつ安定して人材育成ができる体制は必須であり、そのような施策を実施すべきである。

2.3 評価および進捗管理

- HPCI戦略プログラムやポスト「京」重点課題と同様に成果創出加速プログラムでも、科学に基づく評価・議論が実施されるべきである。特に「富岳」だからできること、できたことが評価されるべきである。
- プロジェクトの進捗管理に関して、研究においては当初の予定と異なる方向に進むことは普通にあることで、思わぬ方向に発展することはむしろ望ましい場合もある。各分野の科学研究の実情に即した進捗管理が望まれる。

2.4 「富岳」運用への要望（1/3）

- 「富岳」においては様々な高速化技術が採用されているが、その特性をコンパイラが必ずしも十分に引き出せていない場合がある。
- 成果創出加速プログラムにおいては、「富岳」の特性を十分に考慮したアプリケーション・ソフトウェアのチューニングを実施すると同時に、コンパイラの改善活動も実施している。
- 「富岳」の利用を高度化するためにもアプリケーション・ソフトウェアの継続的な性能チューニングと同時に、それを支えるコンパイラの機能強化が必要である。
- コンパイラを含めたシステム側とアプリケーション・ソフトウェア開発側との性能向上のための継続的な議論と、そこでの議論を反映したコンパイラの機能強化が望まれる。

2.4 「富岳」運用への要望（2/3）

- 「富岳」のデータストレージが必要量に比べて大幅に不足しているという声が少なからずある。
- 計算規模の拡大だけでなく、計算の質の変化によって出力すべきデータが飛躍的に増大したケースもある。
- 研究不正防止などの観点、データ科学・AIの推進の観点からもデータストレージ容量への要求は飛躍的に増大している。
- 「富岳」のストレージ容量の拡大を初め、今後のシステム開発においては、これまで以上に大量のデータを保存・高速に利用できる仕組みを整備することが望まれる。

2.4 「富岳」運用への要望（3/3）

- 「富岳」などフラッグシップ計算機における全系規模の超大規模解析と、フラッグシップ計算機の一部や第2階層計算資源における大規模解析とのギャップが大きく、フラッグシップ計算機での超大規模解析成果の下方展開が依然として困難である。
- 主な理由は、大規模大量データの取り扱いの困難さである。大規模解析を支える周辺技術の高性能化も必要である。
- 今後ますますその差が大きくなると思われるので、「富岳」での環境改善はもとより、今後のシステム開発においては、これら周辺技術への大幅な投資が必要である。

3. HPCIエコシステムの構築（1/4）

- 第6期科学技術・イノベーション基本計画では、我が国が推進する長期的な科学技術政策としてSociety5.0の実現、持続可能な社会への変革、研究力強化、教育・人材育成など、短期的な科学技術政策として、デジタル田園都市国家構想、気候変動問題、経済安全保障などが重要視されている。
- これらの政策に対して「富岳」を中心としたHPCIを活用した計算科学が非常に重要な役割を担うことが期待されている。
- HPCIには、例えばSociety5.0における物理空間とサイバー空間を融合するデジタルツインの実現に向けて、計算機パワー、ネットワーク、アプリケーション・ソフトウェア、人材、技術の観点で重要な貢献が可能であり、持続可能な社会への変革やSociety5.0の実現に向けた重要な国家基盤として適切な予算を配分すべきである。

3. HPCIエコシステムの構築（2/4）

- 我が国の予算状況も厳しい状況下では、十分な予算を継続的に確保することは困難な状況であり、HPCIとしても様々なルートから継続的に予算を確保する仕組み（エコシステム）を確立することが求められている。
- 前述した重点化政策に対し、HPCIを活用した具体的な事業を積極的に提案し、より大きく貢献することが必要である。
- 計算科学主導のプロジェクトに限らず、共通基盤ツールである計算科学を媒介に、広く一般的な科学技術プロジェクトや事業との連携や新規応用分野の開拓を積極的に推進し、HPCIの利用促進や研究コミュニティの活性化、人材育成など計算科学技術の振興を進めるべきである。

3. HPCIエコシステムの構築（3/4）

- 産業界からの投資を呼び込むための施策を実施すべき。
- 「富岳」を使えば今まで解けなかった問題が解けるということが重要であるが、それと同時に「富岳」と手元の計算機がシームレスに連携できることも重要であり、その観点でアプリケーション・ソフトウェアの第2階層計算資源やより広い計算機への普及活動を推進すべきである。
- 産業界へのアプリケーションの普及のためには、アプリケーション・ソフトウェアの研究開発を担当する大学・研究機関とアプリケーション・ソフトウェアの保守サービスやマイナーな改良等のサポートを主に担当するソフトウェアベンダーとの戦略的連携が必要である。
- そのための継続的な予算が必要であるが、継続的に予算が確保できるプロジェクトはなく、企業からの投資を呼び込む必要がある。

3. HPCIエコシステムの構築（4/4）

- 企業において数値シミュレーションの利用はかなり普及しているが、「富岳」や第2階層計算機の利用となると依然としてハードルが高い状況である。いくつかの問題点があるが、これらの問題点を解決できる人材の育成や確保が必要である。
- 登録機関で実施されている利用支援や、裾野拡大のための各種事業や人材育成に向けた取り組みを更に強化する必要がある。
- サポートを担当できるソフトウェアベンダーの育成も必要であり、マッチングファンドやベンチャーファンドの利用などで、企業の設立と育成を支援する投資を実施すべきである。
- セキュリティに関しては産業分野において基準となるものがまとめられている場合もあるが、最終的には企業側の要件とのマッチングを図る取り組みが必要となる。このような取り組みも利用支援の一環として進めるのが望ましい。

4. 次期フラッグシップ計算機の開発

4.1 独自技術とコモディティ技術（1/3）

- 「富岳」の開発においては「京」での反省も踏まえ、わが国の独自技術を採用しつつも商用展開（商用機としての展開）ならびに産業展開（産業利用）を念頭に、世界共通的に使われるOSSへの対応も考慮したシステム開発が行われた。次期フラッグシップ計算機開発においても、上記観点を考慮した開発を行うべきである。
- 産業応用を考えた場合、市販ソフト、OSSといったアプリケーション・ソフトウェアが実行できるといった観点からコモディティCPUを搭載したマシンが使いやすいという意見も少なくない。

4.1 独自技術とコモディティ技術（2/3）

- 市販ソフトやOSSよりも高性能な国家プロジェクト等で開発された流体・構造アプリケーション・ソフトウェアは利用希望が多く、大規模解析のニーズも高い。
- 産業界が必要とするアプリケーション・ソフトウェアを初め、それぞれの分野で必要とされるアプリケーション・ソフトウェアが動かさないとすると、これまで築いてきた計算科学技術振興の成果が無駄になってしまう。
- ある程度の汎用性は必須であり、これまで開発、利用してきたアプリケーション・ソフトウェアを継続的に利用できる事への配慮も必要である。

4.1 独自技術とコモディティ技術（3/3）

- OSS等が実行可能な汎用性を確保しつつ次期フラッグシップ計算機としての圧倒的な性能を実現するためには、次期フラッグシップ計算機のどの部分は我が国独自技術を用い、どの部分はOSSを含めコモディティ技術を採用するかを検討を慎重に実施すべきである。
- 次期フラッグシップ計算機においては、フラッグシップ計算機だけで汎用性を確保するのではなく、HPCI全体において汎用性を確保する考え方もある。
- 次期フラッグシップ計算機のシステム検討の際には、第2階層計算資源との連携、役割分担も考慮に入れた上で次期フラッグシップ計算機の検討を行うことが望ましい。

4.2 目指すべき方向性 (1/2)

- 次期フラッグシップ計算機は圧倒的な性能・機能を実現することが求められているが、ムーアの法則の終焉など従来の要素技術の延長でその圧倒的な性能を実現することは非常に困難な状況にある。
- 「京」や「富岳」の開発においては重要なアプリケーション・ソフトウェアで成果が出せるシステムという観点でシステム検討（アプリケーション・ドリブン）が進められ、できるだけ多くのアプリケーション・ソフトウェアで成果出せるように汎用的なシステムが開発されてきた。
- 従来の延長線での性能向上の限界が見えてきたため、これまでの様に引き続き性能向上を求めるなら、この様なアーキテクチャでしか実現できないと言った検討結果（アーキテクチャ・ドリブン）が示されている。

4.2 目指すべき方向性 (2/2)

- アプリケーション・ドリブンにしる、アーキテクチャ・ドリブンにしる、次期フラッグシップ計算機開発においては、従来以上に協調設計 (Co-designing) での取り組みが極めて重要となる。
- 協調設計を突き詰めると、各アプリケーション・ソフトウェアの専用機にたどり着くことにもなる。複数の異なる特性を持ったアプリケーション・ソフトウェアに対し、それぞれに特化することで圧倒的な性能を実現する複数のシステムを開発することも考えられるが、我が国の状況を考えると現実的ではない。
- 何を目指して次期フラッグシップ計算機を開発するのかの議論および協調設計が従来以上に重要となる。今後実施する次期フラッグシップ計算機開発のための議論や協調設計において十分な検討ができるように適切な予算と十分な体制を構築して、しっかりとした議論を実施すべきである。

4.3 アプリケーション・ソフトウェア

- アプリケーション・ソフトウェアの計算性能は、計算機ハードウェアの性能バランスとアプリケーション・ソフトウェアの特性が合致するかどうかで決まるため、計算機との相性がある。
- 「京」「富岳」では、多くの特性が異なるアプリケーション・ソフトウェアに対してある程度の性能を出すことを目指して、汎用的システムとして開発されてきた。しかしながら、それも限界に近付いている。
- 将来にわたって継続的に成果を出すためにはアプリケーション・ソフトウェア側も、アルゴリズムを見直すなど特性を変化させ、計算機選択の幅を広げることが求められている。
- 継続的に成果を創出するためにも、アプリケーション・ソフトウェア側も将来を見越して様々な性能バランスを持った計算機への適合性を向上させる努力が必要である。

4.4 フラッグシップ計算機と第2階層計算機

- 次期フラッグシップ計算機としては、より多くのアプリケーション・ソフトウェアで性能が出せるものが望ましいが、計算機の性能バランスとアプリケーション・ソフトウェアの特性とが適合しないものも存在することになる。
- 計算機の性能バランスと適合しないアプリケーション・ソフトウェアに対しても、フラッグシップ計算機は絶対的な規模・性能を有した唯一無二の計算機でありその存在価値は大きい。
- 様々な特性を持ったアプリケーション・ソフトウェアを使って、超大規模解析から中小規模の大量解析など様々な解析が実行される。これらの解析を次期フラッグシップ計算機だけで全て対応することは不可能であり、次期フラッグシップ計算機や第二階層計算資源を含めたHPCI全体として適材適所で対応すべきである。
- この様な観点も含めて、次期フラッグシップ計算機を中心にHPCI全体としての成果を最大とするためにはどうすべきかの議論を十二分に実施すべきであり、そのための適切な予算配分と体制を構築すべきである。

4.5 費用配分

- フラッグシップ計算機は科学的・社会的成果を出すためのツールであり、システムの開発完了後は、ただ運用するだけで良いというものではない。システムを運用するための運用費だけでなく、フラッグシップ計算機を使って成果を出す人の人件費も成果を創出するための必須費用として当然考慮すべきである。
- 「京」「富岳」のプロジェクトでは、システム開発の費用に対して、アプリケーション・ソフトウェアの開発費用、フラッグシップ計算機運用期間における解析実施の費用が十分ではなかった。次期フラッグシップ計算機開発においては、アプリケーション・ソフトウェアの開発費用は基より、運用期間における解析実施のための費用も最初から考慮しておくべきである。
- プログラム開発の効率化に大きく寄与するコンパイラ能力の強化、実際の解析を実施する上で必要となるストレージ性能・容量、ネットワーク性能、可視化などの前後処理を担当する周辺システム・環境の整備等に従来以上の投資が望ましい。

4.6 Feasibility Study (1/2)

- 今後のFSでは、アーキテクチャ・ドリブンで検討されたポスト京FSと、汎用CPUベースのもとアプリケーション・ドリブンで進められた富岳の協調設計（Co-designing）の両方を睨み、次期フラッグシップ計算機開発時の技術的制約の下で適切な協調設計を進めることが望まれる。
- 次期フラッグシップ計算機開発に関しては、これまで指摘した様々な重要な課題があり、これらの課題に対する十分な検討が必要である。そのため、今後実施する次期フラッグシップ計算機開発のための議論（FS）において十分な議論ができるように、ALL-Japan的な体制を構築し、適切な規模の予算を配算すべきである。

4.6 Feasibility Study (2/2)

- FSにおいては次期フラッグシップ計算機だけの議論ではなく、第2階層計算資源も含めて、アプリケーション・ソフトウェアと計算機の適合性に関する整理も実施すべきである。
- アプリケーション・ソフトウェア側とシステム側との議論は、FSでの実施だけにとどまらず、次期フラッグシップ計算機運用開始後も、性能改善活動によるコンパイラ機能の強化やアプリケーション・ソフトウェアのチューニング、更には次次期フラッグシップ計算機への提言などを引き続き実施すべきであり、そのための継続的な体制を構築すべきである。

5. あとがき

- 本書は現在実施されている「富岳」成果創出加速プログラム、HPCIエコシステム並びに次期フラッグシップ計算機に関して、計算科学・計算機科学コミュニティからの意見を踏まえて議論を行った結果をまとめたものである。フラッグシップ計算機を中心としたHPCIが、様々な科学的・社会的課題の解決を通じて、より良い社会の実現に継続的に貢献することが期待されている。